المرحلة الرابعة
فيزياء الحالة الصلبة Solid State Physics
الفصل الاول: التركيب البلوري Crystal Structure

المقدمة:

توجد المادة (العناصر والمركبات) بثلاث حالات كما عرفنا سابق او هي الحالة الصلبة والسائلة والغازية وتختلف المادة في كونها تمتلك احدى هذه الحالات باختلاف المسافات البينية ومقدار قوة الترابط بين ذراتها. ويجب الاشارة هنا الى ان الضغط ودرجة الحرارة هما المسببان الرئيسان لتغير حالة المادة هناك حالة رابعة للمادة هي حالة البلازما والتي تكون فيها المادة عبارة عن غاز متأين، وحالة خامسة تظهر فيها المادة بشكل دقائق نووية ذات طاقة عالية ومما سبق استعراضه يمكننا ان نصل الى نتيجة مفادها " ان الطاقة الحركية للجزيئة او الدقيقة المشحونة هي المسؤولة عن تحديد الحالة التي تظهر فيها المادة ".

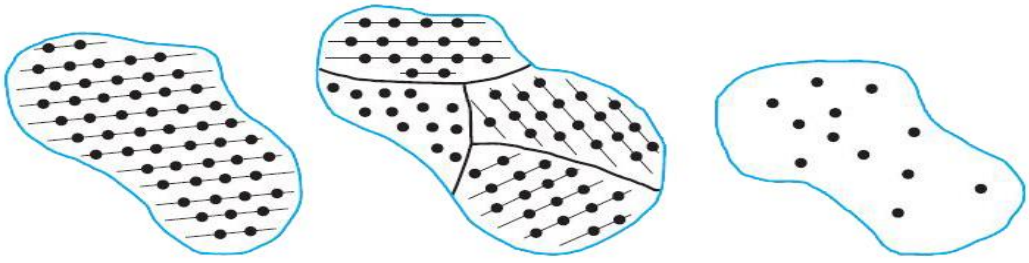
المواد الصلبة المتبلورة وغير المتبلورة:

المواد المتبلورة Crystalline: هي المواد الصلبة التي تكون ذراتها مرتبة بشكل هندسي بحيث تكون مواقعها حدودية في هذا الشكل وتكون هذه الدورية بترتيب طويل المدى اما في بعدين للشبائك ثنائية الابعاد او ثلاثة ابعاد للشبائك ثلاثية الابعاد.

ان المواد المتبلورة تحوي صفوفا من الذرات المتجمعة والمرتبة بشكل دوري وتمتلك نوعا من التماثل Symmetry ويمكن اعتبار تركيبها تكرارا لأية خلية وحدة ومن هذه المواد هي الحديد والذهب وكلوريد الصوديوم وغيرها.

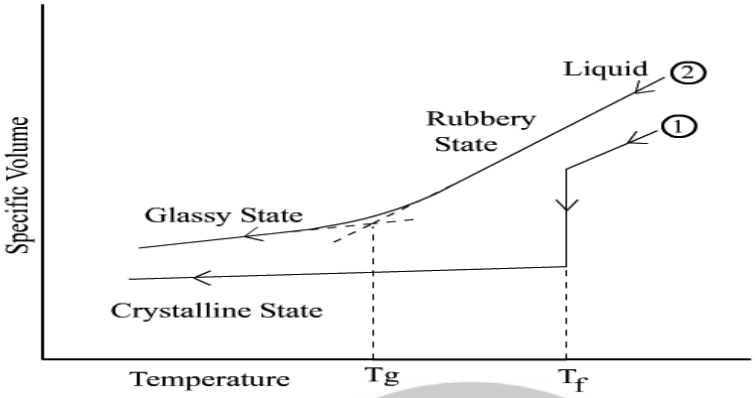
المواد غير المتبلورة non–Crystalline: وتسمى ايضا بالمواد العشوائية (Amorphous) : وهي المواد التي تتجمع ذراتها بصورة عشوائية وبدون ترتيب ومن هذه المواد الزجاج .

وهناك مواد متبلورة وغير متبلورة في آن واحد مثل السليكون والجرمانيوم والسبب يعود الى طريقة تحضيرها او كيفية تكونها.

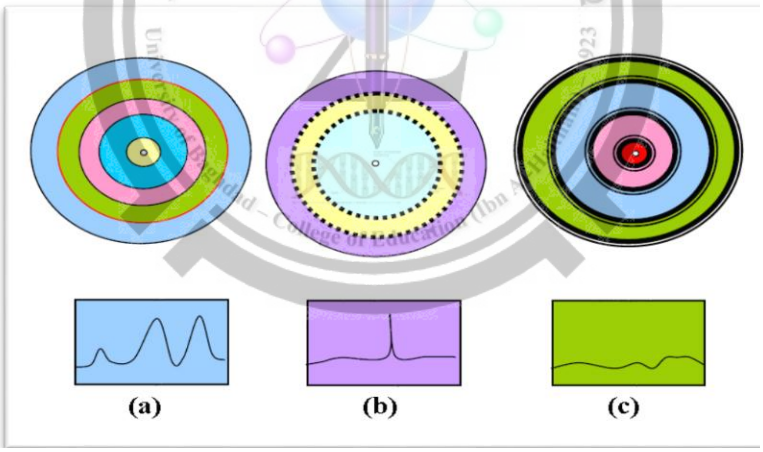


يمكن التمييز عمليا بين المواد المتبلورة وغير المتبلورة بثلاث معايير مستقلة هي:

1- تنصهر المواد المتبلورة فجأة وعند درجة حرارة معينة ثابتة دائما اما المواد غير المتبلورة فتنصهر على مدى معين لدرجات الحرارة.



2- تكون المواد غير المتبلورة تشكيله منتشرة ومتبعثرة عند حيود الاشعة السينية منها على شكل حلقات متحدة المركز، بينما هذه التشكيلة تكون للمواد المتبلورة عبارة عن بقع spots متميزة ومنفصلة بعضها عن بعض وذات تماثل معين.



(XRD) of (a) Polycrystalline (b) single crystal (c) Amorphous crystal

3- تكون جميع المواد المتبلورة متباينة الخواص الاتجاهية anisotropic وبدرجات متفاوتة اما المواد غير المتبلورة فتكون جميعها متماثلة الخواص الاتجاهية Isotropic اي لا يظهر اي تأثير للاتجاه على خواصها.

مصطلحات اساسية:

علم البلورات Crystallography: هو العلم الذي يهتم بدراسة المواد الصلبة بجميع اشكالها وظواهرها ويقسم الى:

1- **علم البلورات الهندسي:** ويهتم بدراسة تماثل البلورات واشكالها الخارجية.
2- **علم البلورات الكيمياوي:** يهتم بدراسة منشأ البلورات وكيفية نموها.

البلورة: عبارة عن جسم صلب يحتوي على عدد من الذرات مصطفة بشكل هندسي معين ويتكون من وحدات غاية في الصغر تكرر بانتظام في الابعاد الثلاثة، تسمى خلايا الوحدة cell units .

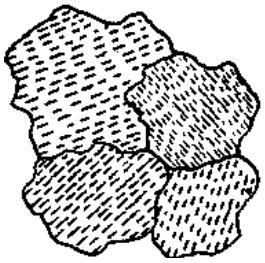
ان اساس البناء البلوري هو التكرار وهناك بلورات على انواع:

1- **البلورات الحقيقية Real crystal** وتمثل معظم البلورات الموجودة في الطبيعة وتحتوي على بعض العيوب والتشوهات.
2- **البلورات المثالية Perfect crystal** وهي بلورت مفترضة حيث اننا نفرض وجود بلورة مثالية خالية من العيوب والتشوهات لغرض الدراسة ولا توجد بلورة مثالية في الطبيعة وهي تشبه فكرة الغاز المثالي وتمتاز البلورة المثالية:

أ- بالدورية Periodicity المنتظمة ثلاثية الابعاد حيث ان المجاميع المتماثلة من الذرات تكرر نفسها عند فواصل او فسح متساوية تماما.
ب- بانها يمكن ان تمتلك تشكيلات هائلة من التنظيمات او الترتيبات الدورية.

انواع البلورات الحقيقية:

أ- البلورة الاحادية Single crystal: حيث تمتد دورية التشكيلية او الانموذج البلوري الثلاثي الابعاد خلال البلورة بأكملها.
ب- البلورة متعددة التبلور Poly crystalline حيث لا تمتد دورية الانموذج خلال البلورة بأكملها بل تنتهي عند حدود داخل البلورة تدعى بحدود الحبيبات grain boundaries.



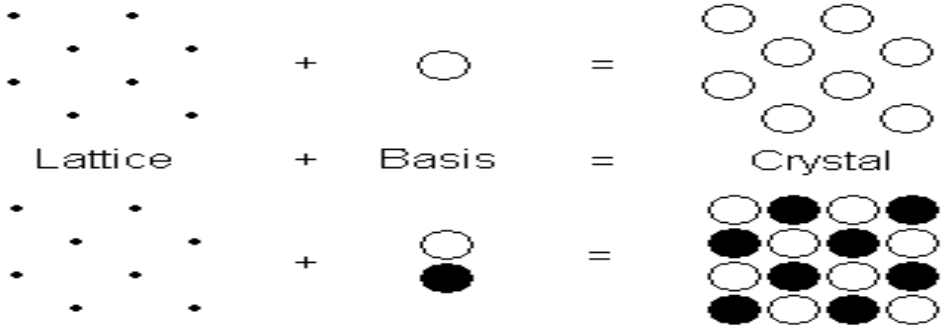
- تعرف البلورة بأنها تجمع لعدد لانهائي من الوحدات المتماثلة تتكرر بشكل دوري ومنتظم (إذا كانت مثالية) في جميع اتجاهات الفضاء.
- تدعى الوحدات بوحدات البناء البلوري أو القواعد (الأساس base).
- تمثل كل قاعدة بنقطة هندسية (بالمعنى الرياضي) ندعوها عقدة ومجموعة العقد الموزعة بانتظام ودورية تشكل ما نسميه **شبيكة بلورية: وهي مفهوم رياضي يعبر عن هندسة البلورة.**
- أي ان البلورة تمثل تتابع منتظم للقاعدة المتموضعة في عقد الشبيكة البلورية الموزعة بشكل دوري في الفراغ (الفضاء). وبشكل مختصر:

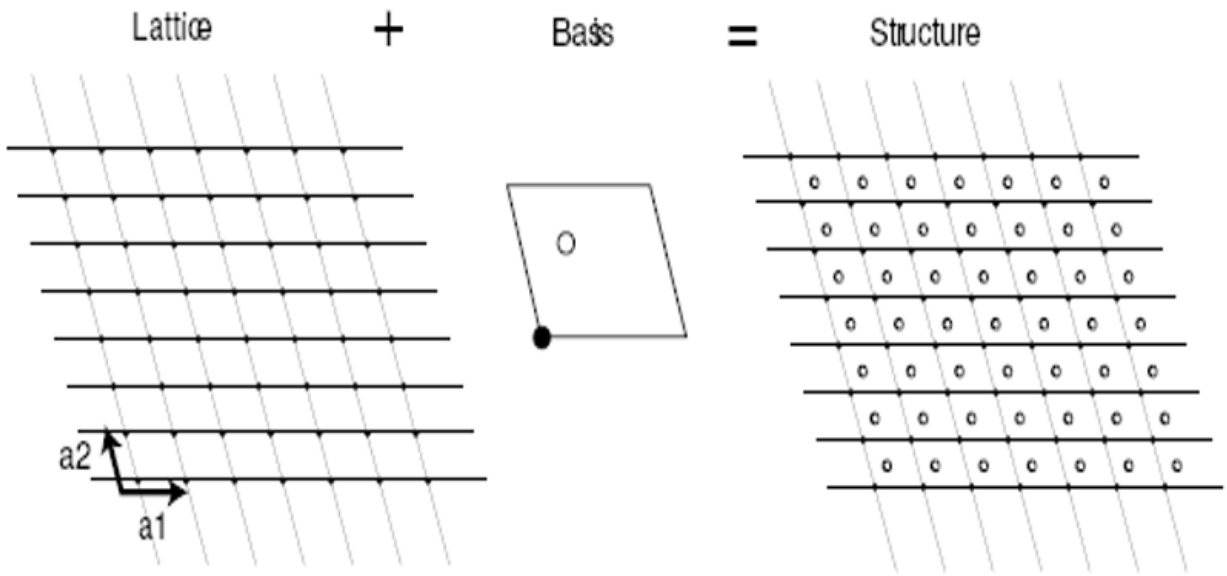
شبيكة بلورية + قاعدة (أساس) = بنية بلورية

Crystal Structure = Lattice + Basis

يجب أن تكون كافة القواعد في كل شبيكة بلورية متماثلة في تركيبها وعددها ويمكن أن يكون العدد ذرة أو عدة مئات أو ألوف من الذرات شريطة أن تكون خاضعة لشروط الدورية.

التركيب البلوري Crystal structure: ويمكن تعريفه من العلاقة التي تربط كل من الاساس Basis والشبكية lattice





الاساس: عبارة ذرة او ايون او جزيئة او مجموعة من الذرات يطلق عليها نقطة وترتبط كل نقطة مع النقاط الاخرى لتشكيل هيئة معينة ويجب ان يمتاز الاساس المرافق لكل نقطة بان يكون:

1- متماثل الاجزاء من حيث التركيب والترتيب والتوجيه.
2- عدد الذرات في خلية الوحدة الاولية مساوٍ لعدد ذرات الاساس.

الشبيكة: مجموعة من النقاط مرتبة بنظام معين وليست مجموعة من الذرات ولوصف التركيب البلوري يجب مرافقة ذرة او مجموعة من الذرات لكل نقطة من نقاط الشبيكة والتي تدعى بالأساس.

ما الفرق بين التركيب الذري Atomic structure والتركيب البلوري Crystal structure؟

التركيب الذري يتعلق بعدد النيوترونات والبروتونات في نواة الذرة وعدد الالكترونات في المدارات الالكترونية. اما التركيب البلوري فيعنى بتركيب الذرات داخل المواد الصلبة البلورية بتشكيلات معينة.

شبيكة برافيز Bravais والمتجهات الانتقالية في البلورة:

الشبيكة الفضائية: هي مجموعة من النقاط المرتبة بنظام ما وتعيد نفسها بصورة دورية في الفضاء الثلاثي الابعاد وتدعى عادة بالشبيكة البرافيزية Bravais Lattice نسبة الى مبتكرها برافيز عام 1848.

يتم تحديد الشبيكة ذات البعد الواحد بلالة متجه واحد هو $\vec{a}$ والشبيكة ثنائية الابعاد بالمتجهين $\vec{a}$ و $\vec{b}$ اما الشبيكة الثلاثية الابعاد فيتم تحديدها بدلالة المتجهات الثلاثة $\vec{a}$ و $\vec{b}$ و $\vec{c}$ وتسمى بالمتجهات الانتقالية اما المتجه الذي

يربط هذه المتجهات الثلاثة فيدعى بالمؤثر الانتقالي ($\vec{T}$) Translation vector ويعبر عنه لشبيكة ذات بعد واحد :

حيث n عدد صحيح $\vec{\mathbf{T}} = \mathbf{n}\,\vec{a}$

اما للشبيكة ثنائية الابعاد $\vec{T} = \mathbf{n_1}\,\vec{a} + \mathbf{n_2}\,\vec{\mathbf{b}}$

اما للشبيكة ثلاثية الابعاد $\vec{\mathbf{T}} = \mathbf{n_1}\,\vec{a} + \mathbf{n_2}\vec{b} + \mathbf{n_3}\,\vec{c}$ **....(1)**

حيث ان n_1 , n_2 , n_3 اعداد صحيحة .

والمؤثر الانتقالي $\vec{T}$ يربط اي موقعين داخل البلورة بحيث تبدو الذرات المحيطة بهذين الموقعين متماثلة ولهذا يسمى بالمؤثر الانتقالي او الزحفي .

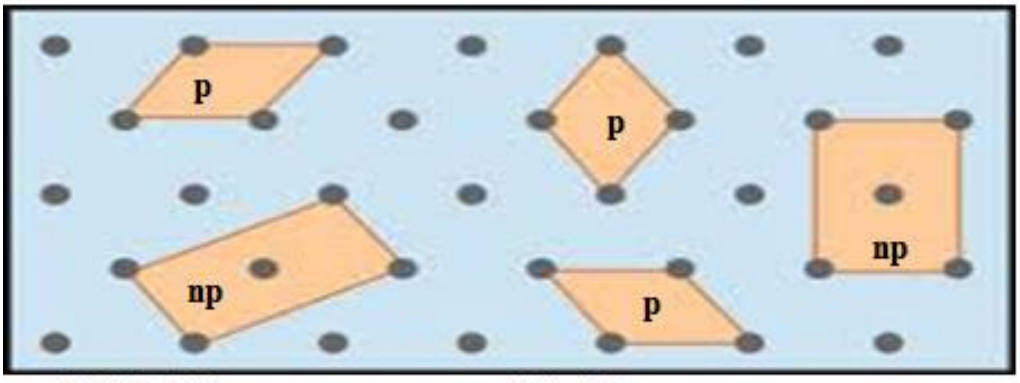
حيث ان $\vec{r}$ و $\overrightarrow{r^1}$ موقعين داخل البلورة

$\overrightarrow{\mathbf{r^1}} = \vec{r} + \vec{T}$ **.....(2)**

بتعويض (1) في (2) ينتج: $\overrightarrow{r^1} = \vec{r} + \mathbf{n_1}\,\vec{a} + \mathbf{n_2}\,\vec{b} + \mathbf{n_3}\,\vec{c}$ **...(3)**

الخلية الأولية (البدائية) Primitive: هي الخلية التي تحتوي على النقاط في اركانها فقط وتكون محاورها بأقصر طول ممكن. وهذه الخلية يمكن أن تملأ الفضاء بكامله عن طريق انسحابات ودورانات مناسبة تعيد الخلية إلى وضع مشابه للوضع الأول ويتوافق مع زاوية مقدارها Φ حيث (n=1,2,3,4,6,) ويفتقر الشكل الذي فيه (n=5,7)إلى التناظر ويتم الدوران حول محور يمر من عقدة شبكية.

الخلية غير الاولية Non-Primitive: هي الخلية التي تحتوي على نقاط شبيكة اخرى بالإضافة الى الاركان ولا تكون اطوال محاورها بأقصر طول ممكن ولا تنطبق عليها المعادلة (3).



P=Primitive np=non-Primitive

خلية الوحدة unit cell: وهي أصغر وحدة في الشبيكة الفضائية، وهي الوحدة التي بتكرارها في الاتجاهات الثلاثة ينتج عنها بلورة كبيرة من المادة الصلبة ولها نفس تماثل خلية الوحدة.

حجم خلية الوحدة ثلاثية الابعاد ويعطى بالعلاقة:

$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \cdot \vec{c}| \quad \text{او} \quad V = |\vec{a} \cdot \vec{b} \times \vec{c}|$$

والمهم هنا اجراء عملية الضرب الاتجاهي (cross) اولا ثم الضرب النقطي dot ويستخدم هذا القانون لحساب حجم الخلايا الاولية وغير الاولية.

مثال: خلية وحدة في بلورة متجهاتها الاساسية تعطى كالاتي:

$$\vec{a} = a\hat{i} \quad , \quad \vec{b} = a\hat{j} \quad , \quad \vec{c} = a\left(\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}\right)$$

احسب حجم هذه الخلية ثم صفها.

التماثل البلوري Crystal Symmetry:

هناك أربع عمليات يمكن ان تتحدد بها عمليات التناظر داخل البلورة هي:

الانتقال – Translation
الدوران – Rotation
الانعكاس – Reflection
الانقلاب – Inversion

والتناظر هو تكرار او تطابق اجزاء شكل ما حول مستو او مستقيم او نقطة فالدائرة متماثلة حول اي قطر لها واذا امكن وصف وضعية معينة لجسم باكثر من اتجاه واحد بحيث لا يمكن التمييز بين هذه الاسطح يقال ان لهذا الجسم متماثل. والكرة متماثلة حول أكبر مستو دائري لها. والمكعب له حالات تماثل عديدة فهو متماثل قطريا وطوليا وعرضيا وحول مركزه.

اما عدم التماثل Asymmetry: فهو الشكل الذي لا يملك صفة التكرار ولا يملك تطابق في اجزاءه مثل اليد اليمنى او اليد اليسرى للإنسان.

ان التماثل في البلورة هو عبارة عن عمليات او مؤثرات يمكن تخيل حدوثها على البلورة وبعد الانتهاء منها تبدو البلورة كاصلها اي تكرار او تعيد اجزاءها الى المواقع التي كانت تشغلها قبل حدوث تلك العمليات.

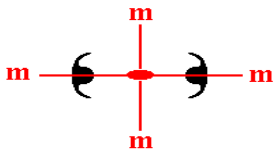
مؤثرات التماثل او العناصر الاساسية للتماثل هي:

1- **محور دوراني مناسب:** هو مستقيم وهمي يمر بمركز البلورة بحيث لو دارت دورة كاملة (630^0) بغير اية ازاحة لتكررت خلال تلك الدورة وضعيات البلورة عددا من المرات ويجب ان تكون زاوية الدوران Ø أحد الاجزاء المتساوية الحاصلة من قسمة الدورة الكاملة على اعداد صحيحة n تسمى الطية fold.

حيث تماثل هذه الارقام درجات التماثل المسموح بها $n = 1,2,3,4,6$ و $\emptyset = \frac{360}{n}$ حيث ان , 8....... 5 , 7 غير مسموح بها لانها اما ان تترك فراغ او تتراكب خلايا الوحدة ذات اربعة وابسط مثال على المحور الدوراني المناسب هو دوران المروحة ذات ثلاث ريش (3 طيات) $\emptyset = 120^0$ وذات اربعة ريش (4 طيات) $\emptyset = 90^0$.

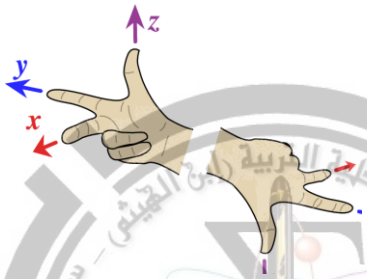
2- **محور دوراني غير مناسب:** وهو حدوث عملية تدوير تعقبها او تليها عملية انعكاس لكي يكرر الجسم نفسه اي انها عملية هجينة (دوران + انعكاس) وتوجد خمسة محاور دورانية انعكاسية يرمز لها $\bar{4}, \bar{3}, \bar{2}, \bar{1}$) $\bar{6}, \bar{5}$, $\bar{1}$ one tild .

3- **مستوى التماثل:** وهو مستوى وهمي يقسم الجسم او البلورة الى نصفين متشابهين بحيث يمكن ان يكون أحد النصفين صورة للاخر مثل جـ متساوين بصورة طولية. ويرمز لهذه العملية (m)(mirror) واذ امكن قـ ة مثلا الى قسمين متناظرين للاعلى والاسفل وقسمين متناظرين لليمين ن المرآة مزدوجة (mm) (double mirror) .



2 m m

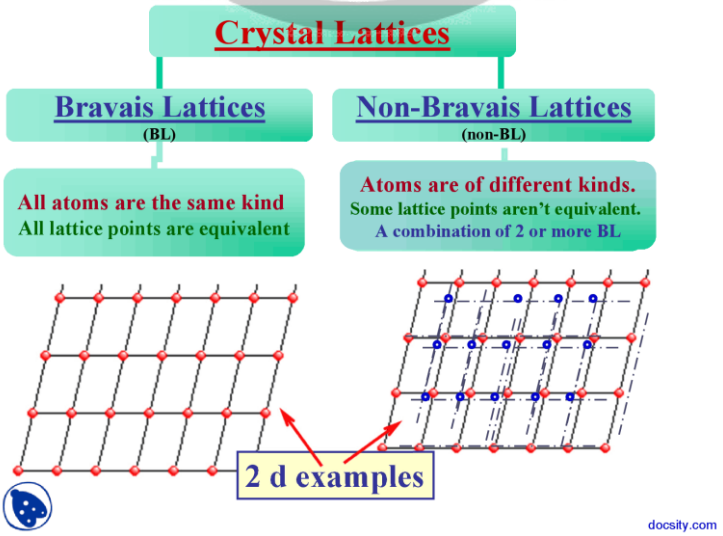
4- **مركز التماثل:** ان مركز التماثل هو مركز انقلاب لان لهذا المركز خاصية قلب جميع الفضاء من خلال نقطة واحدة للتقاطع وابسط مثال لوضعنا ابهام اليد اليسرى ملامسا للابهام اليد اليمنى واحدى اليدين اصابعها للاسفل وباطنها نحونا اما اليد الاخرى فاصابعها الى الاعلى وظهر اليد نحونا نكون قد حصلنا على مركز تماثل ويرمز له $\bar{1}$, $\bar{2}$, $\bar{3}$, $\bar{4}$, $\bar{5}$, $\bar{6}$ one bar $\bar{1}$.



شبائك برافيز Bravais Lattice:

هناك نوعان من الشبائك: برافيز Bravais وغير برافيز Non-Bravais

في شبيكة برافيز، تكون جميع نقاط الشبيكة متكافئة، وبالتالي من الضروري ان تكون جميع الذرات في البلورة من نفس النوع. اما في الشبيكة غير البرافيز فبعض نقاط الشبيكة تكون غير مكافئة.



الشبائك المستوية وتماثلانها:

تكمن أهمية هذه الشبائك لفهم خواص السطوح الفيزيائية للأجسام الصلبة وفهم دراسة حيود الأشعة السينية على تلك السطوح بحيث نتمكن من تقدير المسافة بين النقاط.

والشبيكة كما مر سابقا هي مجموعة من النقاط المرتبة بنظام معين وتعيد نفسها بصورة دورية وتكون عملية الاعادة باتجاه واحد وتسمى شبيكة خطية او ببعدين وتسمى شبيكة مستوية او بثلاثة ابعاد وتسمى شبيكة فضائية والشبيكة الخطية تتكون من نقاط متشابهة ذات ابعاد متساوية وعلى خط مستقيم عمودي او افقي ولهذا هناك نوع واحد اساسي من الشبيكة الخطية بسبب وجود طريقة واحدة فقط ترتيب النقاط والفرق الوحيد هو المسافة الفاصلة بين النقاط.

اما الشبيكة المستوية فيمكن منها الحصول على عدد كبير من الشبائك يمكن ان تجمع في خمسة انواع هي:

1- **شبيكة مائلة:** هي شبيكة عامة ولا توجد علاقة خاصة بين اطوال متجهاتها الاساسية وان الزاوية بين هذه المتجهات غير محدودة القيمة اي ان:

$$\vec{a} \neq \vec{b} \quad ، \quad \emptyset \neq 90^{\circ}$$

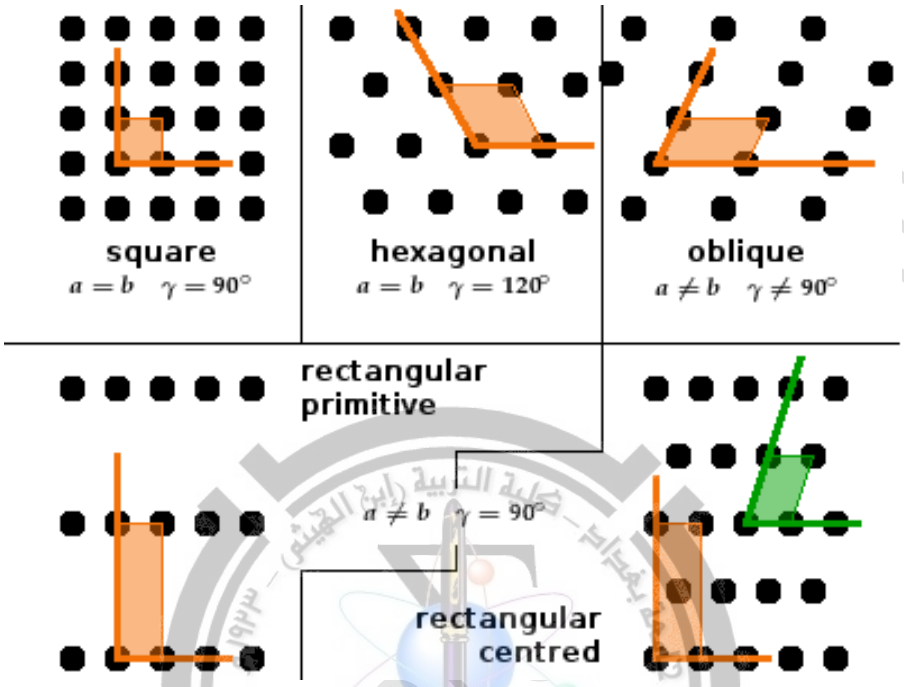
كل ركن يمثل ¼ نقطة وكل خلية تمتلك 1 نقطة(1=4*¼).

2- **شبيكة مستطيلة اولية**: في هذا النوع هناك قيمة محدودة للزاوية $\emptyset \neq 90^{\circ}$ ولا يوجد تحديد لاطوال محاورها $\vec{a} \neq \vec{b}$.كل ركن يمثل ¼ نقطة وكل خلية تمتلك 1 نقطة(1=4*¼).

3- **شبيكة مستطيلة متمركزة**: وهي شبيكة غير اولية تمثل حالة خاصة لشبيكة مائلة بقيمة محدودة للزاوية $\emptyset$ بين محاورها غير المتساويين فعندما تكون $\emptyset = \left(cos^{-1}\frac{a}{2b}\right)$ نحصل على خلايا اولية من شكل متوازي اضلاع ويمكن تشكيل خلايا غير اولية بهيئة مستطيلات وتكون المحاور $\vec{a} \neq \vec{b}$ و $\emptyset \neq 90^{\circ}$. كل ركن يمثل ¼ نقطة وكل خلية تمتلك 2 نقطة (2=1+4*¼).

4- **شبيكة مربعة**: تكون المحاور الاولية متساوية $\vec{a} = \vec{b}$ والزاوية بينهما قائمة $\emptyset \neq 90^{\circ}$. كل ركن يمثل ¼ نقطة وكل خلية تمتلك 1 نقطة(1=4*¼).

5- شبيكة سداسية: يمكن تشكيل شبيكة سداسية من شبيكة مائلة ذات مواصفات خاصة فتكون محاور الشبيكة $\overrightarrow{a} = \overrightarrow{b}$ والزاوية بينهما $\emptyset \neq 120^{\circ}$ وتكون حالة خاصة من شبيكة مستطيلة متمركزة عندما خليتها الاولية معينية الشكل بمواصفات $\overrightarrow{a} = \overrightarrow{b}$ و $\emptyset \neq 60^{\circ} or\ 120^{\circ}$.



الشبائك الفضائية (3D) والانظمة البلورية :

هناك خمسة انواع اساسية من شبائك برافيز(في ثلاثة أبعاد)

1- شبائك بدائية اولية Primitive Lattice

يرمز لها بالرمز (P) حيث تحتوي كل خلية وحدة على $\frac{1}{8}$ نقطة في كل ركن من اركانها الثمانية وبذلك فان كل خلية وحدة اولية تحتوي على نقطة شبيكة واحدة (نقطة $1 = \frac{1}{8} * 8$) .

2- شبائك ممركزة الوجوه Face Centered Lattice

ويرم لها بالرمز (F) وهي تحتوي على $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانها الثمانية بالاضافة الى $\frac{1}{2}$ نقطة شبيكة في الوجوه الستة اي ان مجموع ما تحتويه هذه الشبائك هو 4 نقاط (نقاط $4 = \frac{1}{2} * 6 + \frac{1}{8} * 8$) .

3- شبائك ممركزة الجسم Body Centered Lattice

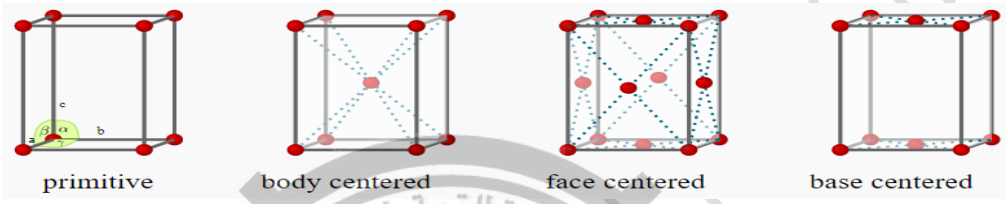
ويرمز لها بالرمز (I) وتحتوي $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانها الثمانية بالاضافة الى نقطة شبيكة واحدة في مركز الجسم اي ان مجموع ما تحتويه هذه الشبائك هو نقطتين (نقطة $2 = 1 + \frac{1}{8} * 8$).

4- شبتنك ممركزة الجانب او القاعدة Base or Side Centered Lattice

يمتاز هذا النوع باحتوائه على $\frac{1}{8}$ نقطة شبيكة في اركانه الثمانية بالاضافة الى $\frac{1}{2}$ نقطة شبيكة في وجهين متقابلين من وجوهه الستة وبالتالي فان مجموع ما يحتويه من نقاط هو نقطتين $= \frac{1}{2} * 2 + \frac{1}{8} * 8)$ (نقطة 2 ويرمز لهذه الشبائك بالرمز A او B او C حسب موقع النقطتين على اوجه الخلية .

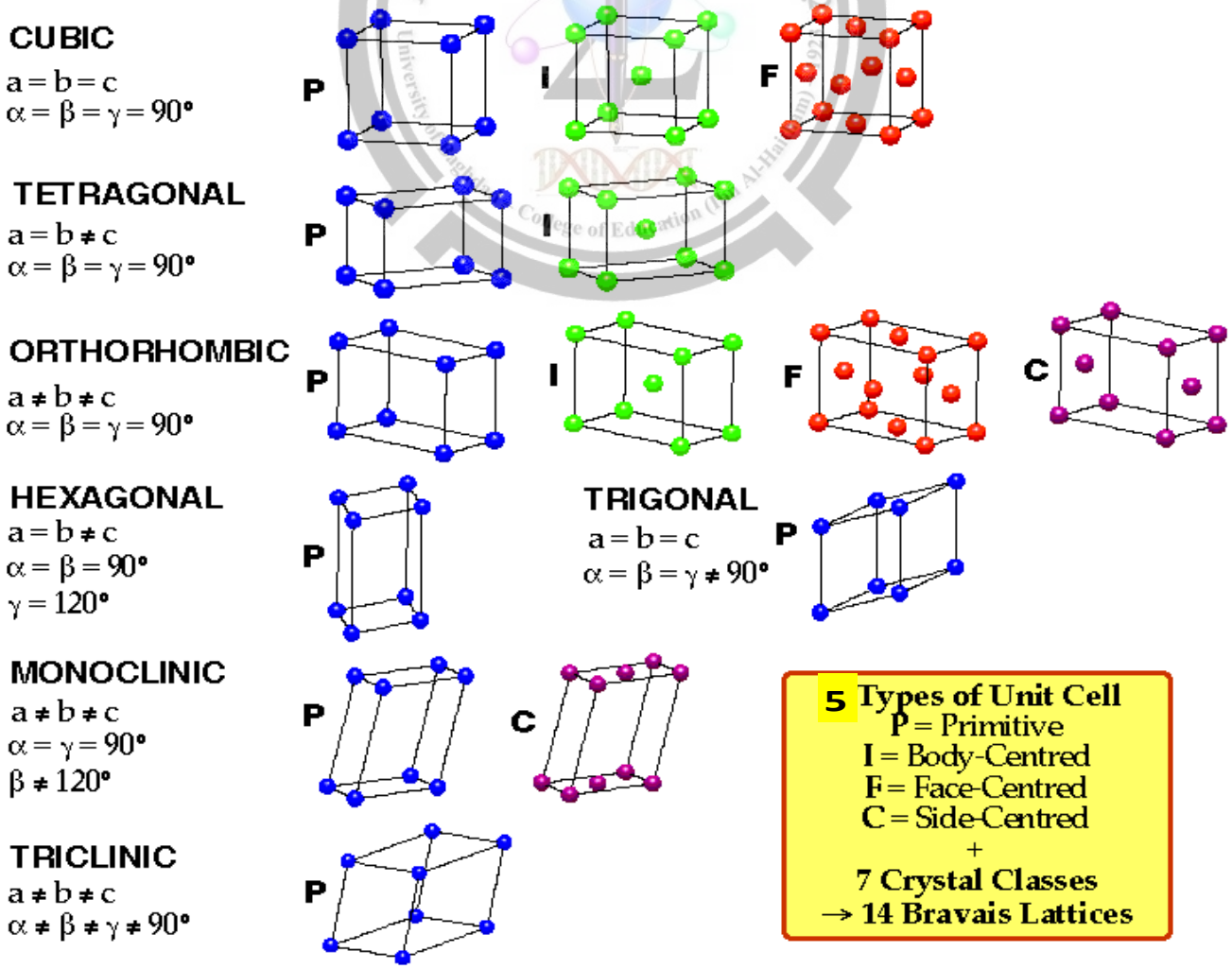
5- شبائك معينية الاوجه Rhombohedral Lattice

وهي حالة خاصة من الشبائك الاولية ويرمز لها بالرمز R . ويكون شكل الخلية معينية الوجوه لكن المحاور الثلاثة غير متعامدة اي ان $\vec{a} = \vec{b} = \vec{c}$ و $(\propto = \beta = \gamma) \neq 90^{\circ}$.

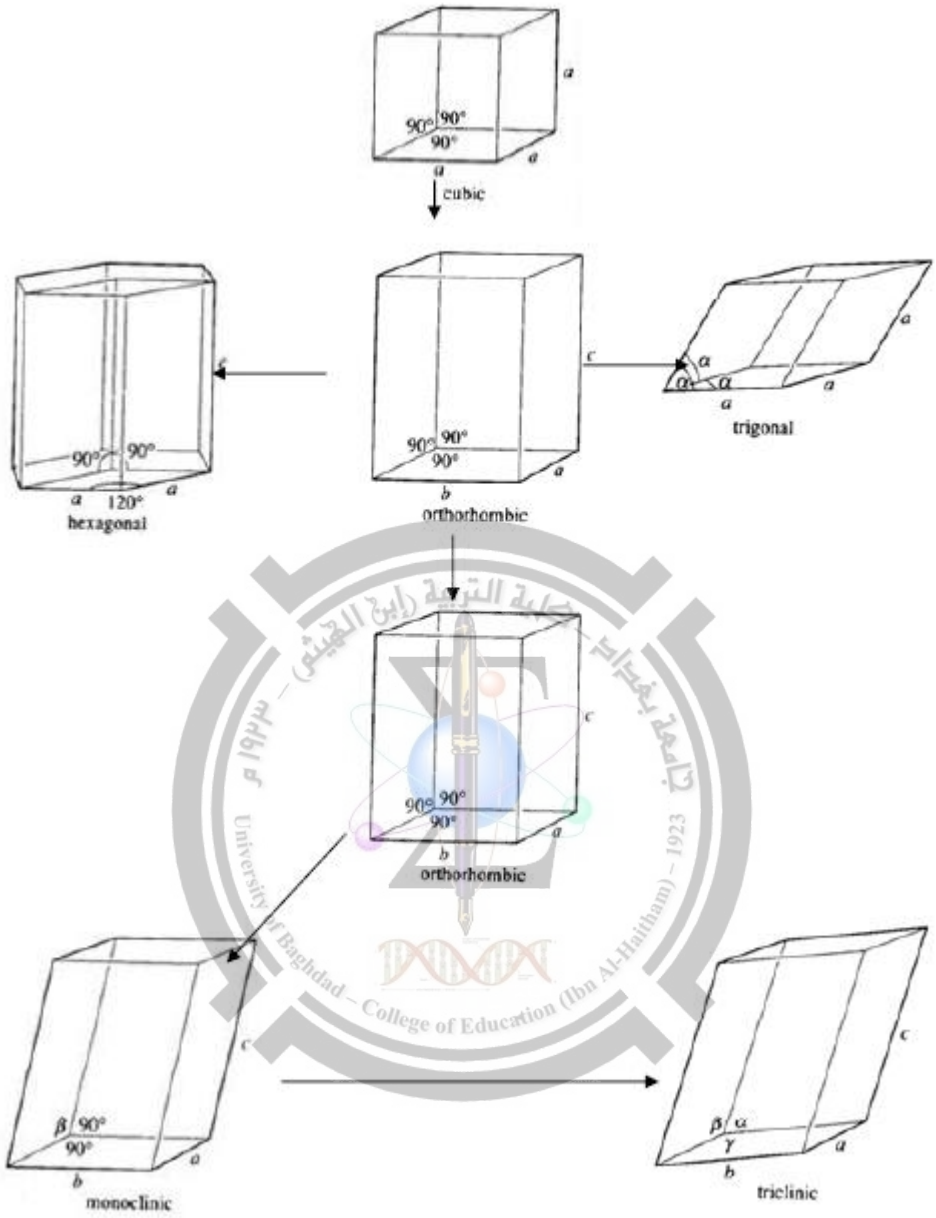


توزع الانواع الخمسة من الشبائك الاساسية على سبعة أنظمة بلورية تتفرع منها أربع عشرة شبيكة برافيزية.

وفيما يلي الأنظمة البلورية السبعة والشبائك البرافيزية الاربعة عشر:



ترتيب الأنظمة البلورية من اعلاها تناظرا الى اوطأها حسب المصدر



نلاحظ ان Trigonal , Hexagonal لهما نفس درجة التناظر

س/ ما هي التراكيب البلورية الثلاثة البسيطة نسبياً والتي تضم المعادن الأكثر شيوعًا؟

الجواب: *FCC*و *BCC* و *HCP*

ميزات الشبائك المكعبة:

يتضمن نظام المكعب ثلاثة انواع من الشبائك هي:

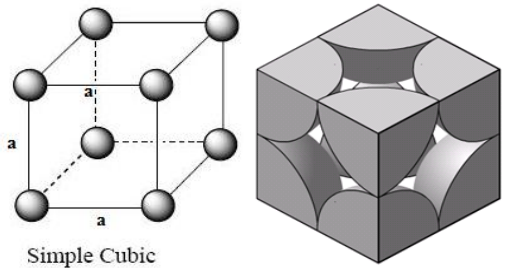
1- مكعب بسيط Simple Cubic (sc أو SC) :

وهو يحتوي على نقطة شبيكة واحدة اي $\frac{1}{8}$ نقطة في كل ركن من الاركان الثمانية ومتجهاته

$$\vec{a} = a\hat{i}\ , \quad \vec{b} = b\hat{j}\ , \quad \vec{c} = c\hat{k}$$

وهي متجهات أولية طول كل منها L او a .

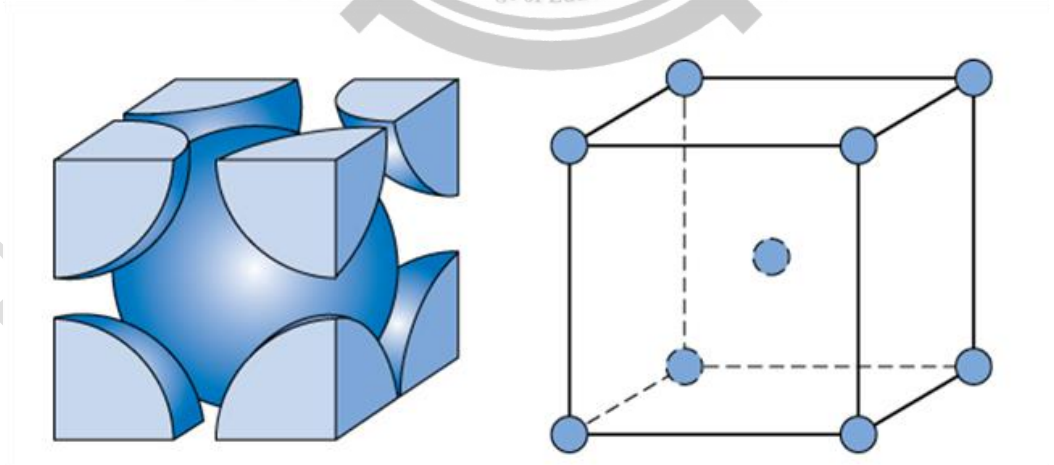
$\frac{1}{8} * 8 = 1$ نقطة واحدة

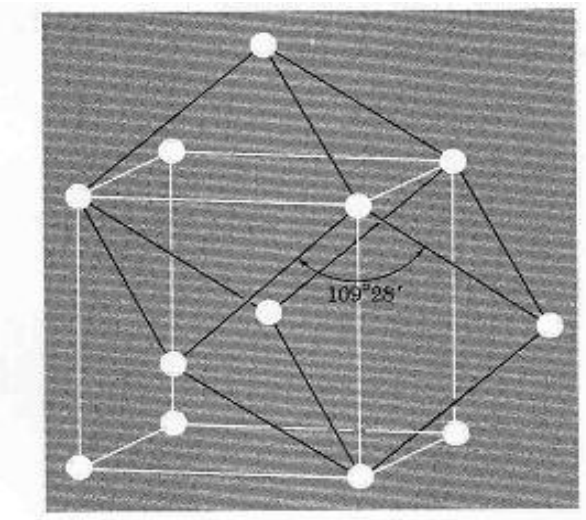


2- مكعب متمركز الجسم Body Centered Cubic (bcc أو BCC):

وهو يحتوي على نقطتين واحدة في الاركان وواحدة في مركز الخلية وهي من الشبائك غير الاولية لانه خلية الوحدة له غير اولية ويمكن حساب المتجهات الاولية ومن ثم خلية الوحدة الاولية له كالاتي:

نرسم ثلاثة متجهات صادرة من نقطة شبيكة في المركز المكعب ونعتبرها نقطة الاصل، بحيث تنتهي بثلاث نقاط واقعة عند اركان المكعب كما في الشكل ونكمل شكل معيني الاوجه لنحصل على خلية الوحدة الاولية ذات المتجهات الاولية : $\vec{a}$`, $\vec{b}$`, $\vec{c}$` .



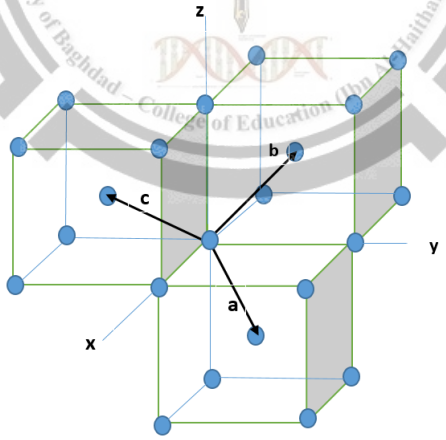


$$\vec{\mathbf{a}} = \vec{a_1} = \frac{a}{2}\left(\hat{i} + \hat{j} - \hat{k}\right)$$

$$\vec{\mathbf{b}} = \vec{a_2} = \frac{a}{2}\left(-\hat{i} + \hat{j} + \hat{k}\right)$$

$$\vec{\mathbf{c}} = \vec{a_3} = \frac{a}{2}\left(\hat{i} - \hat{j} + \hat{k}\right)$$

للشبيكة الأولية



ان خلية الوحدة الاولية معينية الاوجه طول ضلعها $\left(\frac{\sqrt{3}}{2}L\right)$ ومحاورها $\vec{\mathbf{a}}, \vec{\mathbf{b}}, \vec{\mathbf{c}}$ وتحدث مع بعضها زاوية مقدارها (109^o) تقريبا وموقعي النقطتين: $000, \frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

س1/ اثبت ان الزوايا بين اواصر رباعي السطوح tetrahedral من الماس هي نفس الزوايا بين أقطار المكعب المتمركز الجسم BCC، كما في الشكل المجاور. استخدم تحليل المتجه الأولي لإيجاد قيمة الزاوية.

$\overrightarrow{a_1}$ and $\overrightarrow{a_2}$,$\overrightarrow{a_2}$ and $\overrightarrow{a_3}$, or $\overrightarrow{a_3}$ and $\overrightarrow{a_1}$. الزوايا بين:

$$cos\theta = \frac{a_1 \times a_2}{\|a_1\|\|a_2\|} = \frac{\frac{1}{4}a^2(-1-1+1)}{\frac{1}{4}a^2(1^2+1^2+1^2)} = -\frac{1}{3}$$

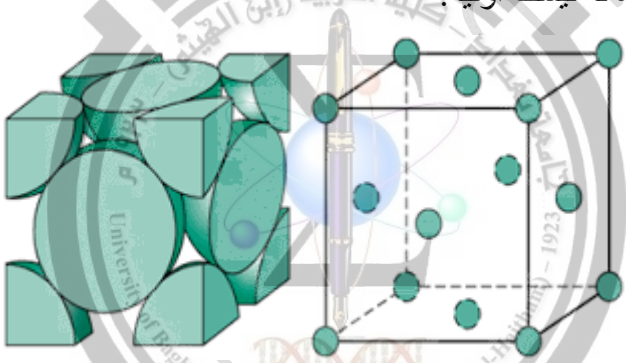
$$\theta = cos^{-}1(-\frac{1}{3}) \approx 109.47^0$$

س2/ اثبت ان حجم خلية الوحدة الاولية لمكعب bcc يساوي $\frac{1}{2}$ حجم خلية الوحدة الاعتيادية لنفس الشبيكة .

$$V = |\vec{a} \times \vec{b} \,.\, \vec{c}| \quad = \quad |\vec{a} \,.\, \vec{b} \times \vec{c}|$$

3- مكعب متمركز الاوجه Face Centered Cubic (fcc أو FCC)

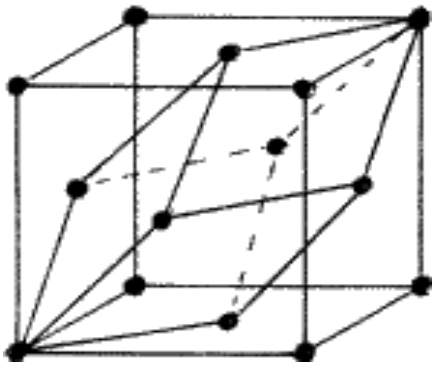
يحتوي على اربع نقاط شبيكة , نقطة من الاركان ونصف نقطة في كل وجه من الوجوه الستة. وهي ليست شبيكة اولية لان خلية الوحدة له ليست اولية.



وللحصول على المتجهات الاولية نرسم ثلاثة متجهات صادرة عن نقطة شبيكة في أحد اركان المكعب ونعتبرها نقطة الاصل بحيث تنتهي بنقاط الشبيكة الواقعة في مراكز الاوجه القريبة من نقطة الاصل كما في الشكل المجاور. نكمل معيني الاوجه لنحصل على خلية الوحدة الاولية ذات المتجهات الاولية:

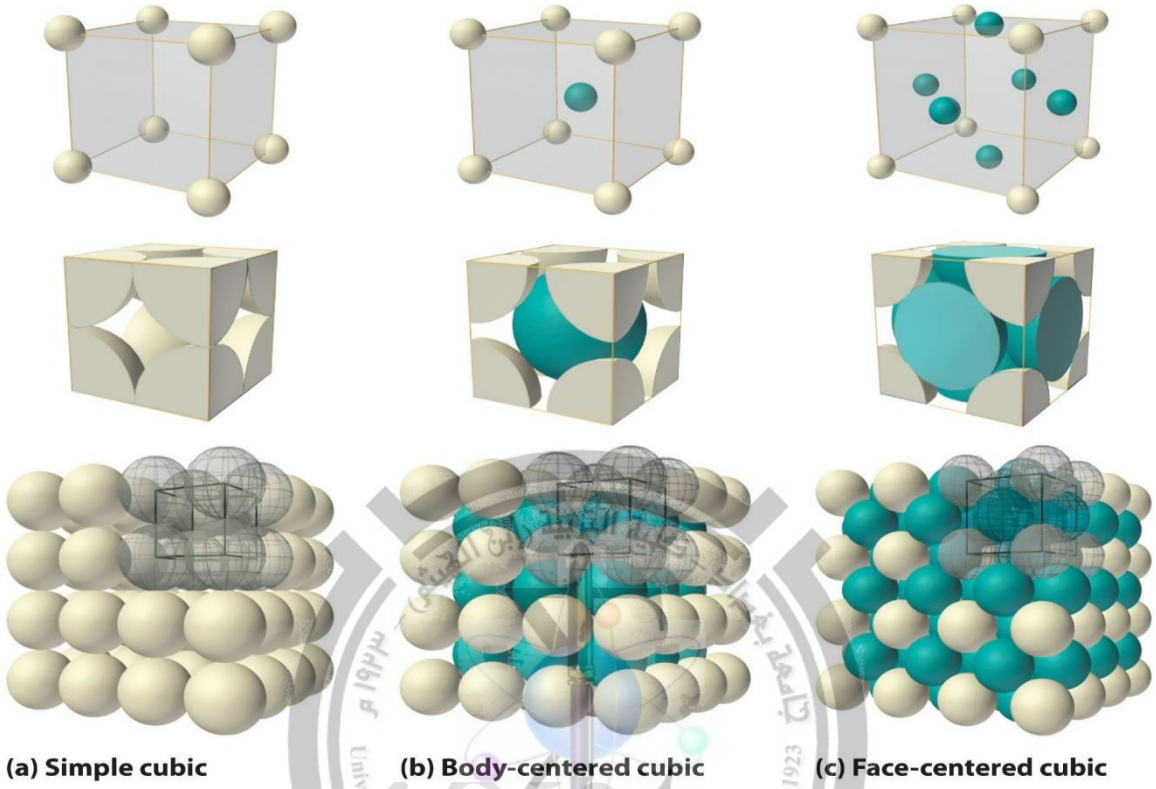
$$\left.\begin{aligned} \vec{a} = \overrightarrow{a_1} &= \frac{a}{2}\left(\hat{i} + \hat{j}\right) \\ \vec{b} = \overrightarrow{a_2} &= \frac{a}{2}\left(\hat{j} + \hat{k}\right) \\ \vec{c} = \overrightarrow{a_3} &= \frac{a}{2}\left(\hat{i} + \hat{k}\right) \end{aligned}\right\}$$

للشبيكة الاولية



مواقع النقاط $000\ ,\ 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}\ ,\ \frac{1}{2}0\frac{1}{2}\ ,\ \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$

س/ اثبت ان حجم الخلية الاولية لشبيكة fcc هو $\frac{1}{4}$ حجم الخلية الاعتيادية لتلك الشبيكة .



نسبة الملء Filling fraction او نسبة الرص Packing Fraction:

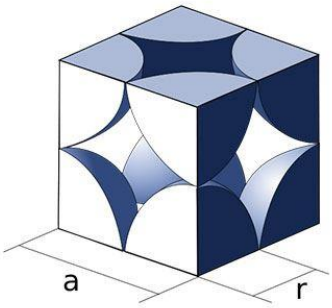
هي النسبة بين حجم الذرات الموجودة في خلية الى حجم تلك الخلية وتختلف الشبائك في نسبة ملء كل منها .ولغرض حساب نسبة الملء نفترض ان الذرات المتجاورة جدا في حالة تلامس , اي ان اقصر مسافة بين نقطتي شبيكة تمثل قطر الذرة (مسافة اقرب الجوار = 2r) وتحسب نسبة الرص كالآتي :

$$\text{نسبة الرص (الملء)} = \frac{\text{حجم الذرة الواحدة} * \text{عدد الذرات في خلية الوحدة}}{\text{حجم خلية الوحدة}} * 100\%$$

$$P.F = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 * N}{V} * 100\% = \frac{4}{3}\pi r^3 * \frac{N}{V} * 100\%$$

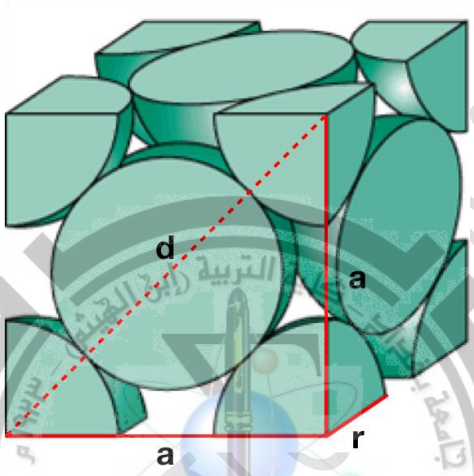
r : نصف قطر الذرة , 2r : قطر الذرة ويمثل مسافة اقرب الجوار

SIMPLE CUBIC UNIT CELL



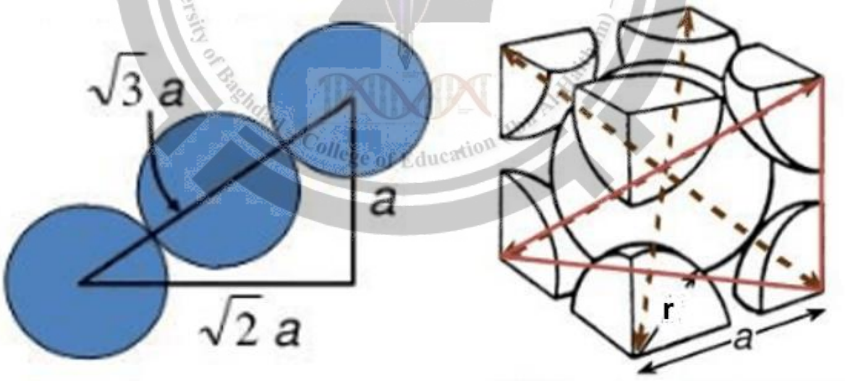
SC

2r=a



FCC

4r=$\sqrt{2}$ a



BCC

4r=$\sqrt{3}$ a

س / ما مقدار نسبة الرص لكل من SC , BCC , FCC والماس

الجدول يمثل بعض مميزات شبائك نظام المكعب وهي SC , BCC , FCC حيث (a=L)

	sc	bcc	fcc
حجم الخلية الاعتيادية	L^3	L^3	L^3
عدد نقاط الشبيكة لكل خلية اعتيادية	1	2	4
حجم الخلية الوحدة الاولية	L^3	$\frac{1}{2}L^3$	$\frac{1}{4}L^3$
عدد نقاط الشبيكة لكل وحدة حجم $\left(\frac{N}{V}\right)$	$\frac{1}{L^3}$	$\frac{2}{L^3}$	$\frac{4}{L^3}$
عدد الجوار الأول (العدد التناسقي)	6	8	12
مسافة الجوار الاول	L	$\frac{\sqrt{3}}{2}L$	$\frac{1}{\sqrt{2}}L$
عدد الجوار الثاني	12	6	6
مسافة الجوار الثاني	$\sqrt{2}L$	L	L
نسبة الملء	0.52	0.68	0.74
نسبة الجزء الفارغ	0.48	0.32	0.26

كيفية حساب الكثافة النظرية

يمكن حساب الكثافة النظرية للمواد باستعمال العلاقة الآتية:

$$\boldsymbol{\rho = \frac{N\, A_w}{V\, N_A}}$$

حيث تمثل $\boldsymbol{\rho}$ الكثافة النظرية $(\frac{g}{cm^3})$ N يمثل عدد الذرات في خلية الوحدة

V يمثل حجم خلية الوحدة (cm^3) و $\boldsymbol{N_A}$ يمثل عدد افكادرو=$6.023*10^{23}$ (atom/mol)

$\boldsymbol{A_w}$ يمثل الوزن الذري g/mol

مثال / يمتلك النحاس تركيب بلوري FCC ونصف قطره الذري 0.128 nm ، والوزن الذري له 63.5 g\mol. احسب الكثافة النظرية له.

الحل / عدد الذرات 4 ، $V=a^3$ ، $4r=\sqrt{2}\,a$, $V=(\frac{4}{\sqrt{2}}r)^3$

$$\boldsymbol{\rho} = \frac{4 * 63.5\ \text{g\mol}}{(\frac{4}{\sqrt{2}} * 0.128 * 10^{-7}cm)^3 * 6.023 * 10^{23}\text{atom/mol}}$$

$=8.89\ \text{g\cm}^3$

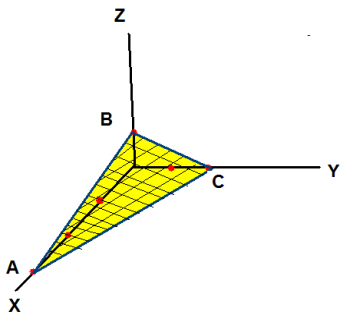
معاملات الاوجه (أدلة ميلر) Miller indices

- لوصف الحالة الفيزيائية للبلورات يجب تحديد مواضع واتجاه المستويات البلورية التي تتحدد من اجل أي مستوي بلوري بواسطة ثلاثة عقد ليست على استقامة واحدة يتحدد من خلالها إحداثيات المستوي البلوري شرط وقوع العقد على المحاور البلورية.

- يمكننا تحديد ما سبق بأن نختار جملة محاور إحداثية تنطبق وتتفق في الاتجاه مع أضلاع الخلية البدائية بحيث يقع مبدأ هذه المحاور على إحدى عقد الشبكة البلورية حيث تتقاطع أضلاع الخلية البدائية.

- إذا كانت النقاط A,B,C إحداثياتها A(3,0,0),B(0,2,0),C(0,0,1) تمثل العقد الثلاثة فإنها سوف تحدد مستويا بلوريا ما هذا المستوي يمكن أن يعين بواسطة الأعداد الثلاثة (321) .

- من وجهة نظر البنية البلورية يمكن تحديد وضع المستوي البلوري واتجاهه بواسطة اصطلاح يستعمل لوصف المستويات البلورية والاتجاهات في البلورة يسمى بمعاملات ميلر وهي مفيدة جدا في اصطلاح الشبكة المقلوبة كما سنرى فيما بعد، تعين معاملات ميلر كما يلي:



ولإيجادها نتبع الخطوات الاتية:

1) نختار نقطة اصل (0) وثلاثة محاور مرجعية (x , y , z) .
2) نحدد تقاطع السطح مع كل محور من المحاور الثلاثة بالقيم (p , q , r).
3) نقوم بقلب قيم التقاطعات p , q , r فاذا كانت جميعها اعداد صحيحة تمثل hkl واذا كان بعض منها او جميعها اعداد كسرية نقوم بضربها بالمضاعف المشترك الاصغر لتحويلها الى اعداد صحيحة للحصول على (hkl) .
4) عند وضع معاملات ميلر بين قوسين (hkl) فهذا يعني مجموعة واحدة من السطوح المتوازية او المتساوية في السطح وليست معاملات ميلر لسطح معين واحد.
5) قد تكون معاملات ميلر جميعها موجبة او سالبة او اعداد مختلطة ولكنها دائما اعداد صحيحة.
6) عندما يكون هناك سطحا موازيا لاحد المحاور البلورية مثل المحور $\overrightarrow{x}$ فان معاملات هذا السطح تكتب بالصيغة (0kl) لان هذا السطح يقطع المحور $\overrightarrow{x}$ في اللانهاية (∞) ومقلوب ∞ هو 0

مثال (1): جد معاملات ميلر لسطح تقاطعه مع المحاور كالاتي:

p = 3 , q = 6 , r = 2

الحل: نجد المقلوب $\frac{1}{2}$ $\frac{1}{6}$ $\frac{1}{3}$

نضرب بالمضاعف المشترك الاصغر $\frac{1}{2} * 6$ $\frac{1}{6} * 6$ $\frac{1}{3} * 6$

∴ معاملات ميلر لهذا السطح هي (213)

مثال (2) : جد معاملات ميلر للسطح الذي تقاطعاته هي $\mathbf{r = \frac{1}{2}}$ و $\mathbf{q = \infty}$ و $\mathbf{p = 4}$

P q r

4 ∞ $\frac{1}{2}$

$\frac{1}{4}$ $\frac{1}{\infty}$ 2 } *4 م.م .أ

1 0 8 معاملات ميلر لهذا السطح هي (1 0 8)

مثال (3) : $-\frac{1}{6}$, $\mathbf{q = \infty}$, $\mathbf{p = 4}$

المقلوبات $\frac{1}{4}$ 0 -6 } * 4

م .م .أ : 1 0 -24

مثال (4) $(1\ 0\ \overline{24})$ (h k l) $\mathbf{p = -\frac{1}{2}}$, $\mathbf{q = \frac{1}{3}}$

P q r

$-\frac{1}{2}$ $\frac{1}{3}$ ∞

المقلوبات -2 3 0

$(\bar{2}3\ 0)$ (h k l)

Ex5: Determine the Miller Indices of a plane which is parallel to x-axis and cuts intercepts of 2 and 1/2, respectively along y and z axes.

Solution:

i) Intercepts	∞	2b	$\frac{1}{2}c$
ii) Division by unit translation	$\frac{\infty}{a}=\infty$	$\frac{2b}{b}=2$	$\frac{3c}{2c}=\frac{1}{2}$
iii) Reciprocals	$\frac{1}{\alpha}$	$\frac{1}{2}$	2
iv) After clearing fraction	0	1	4

يمكن التعبير عن اوجه المكعب الستة بالنحو الاتي :

((001)) أو {001} وهي تمثل السطوح : $(100),(010),(001),(\bar{1}00),(0\bar{1}0),(00\bar{1})$

والعلاقة { } او (( )) تعني جميع السطوح المكافئة لذلك السطح فمثلا {333} تعني :

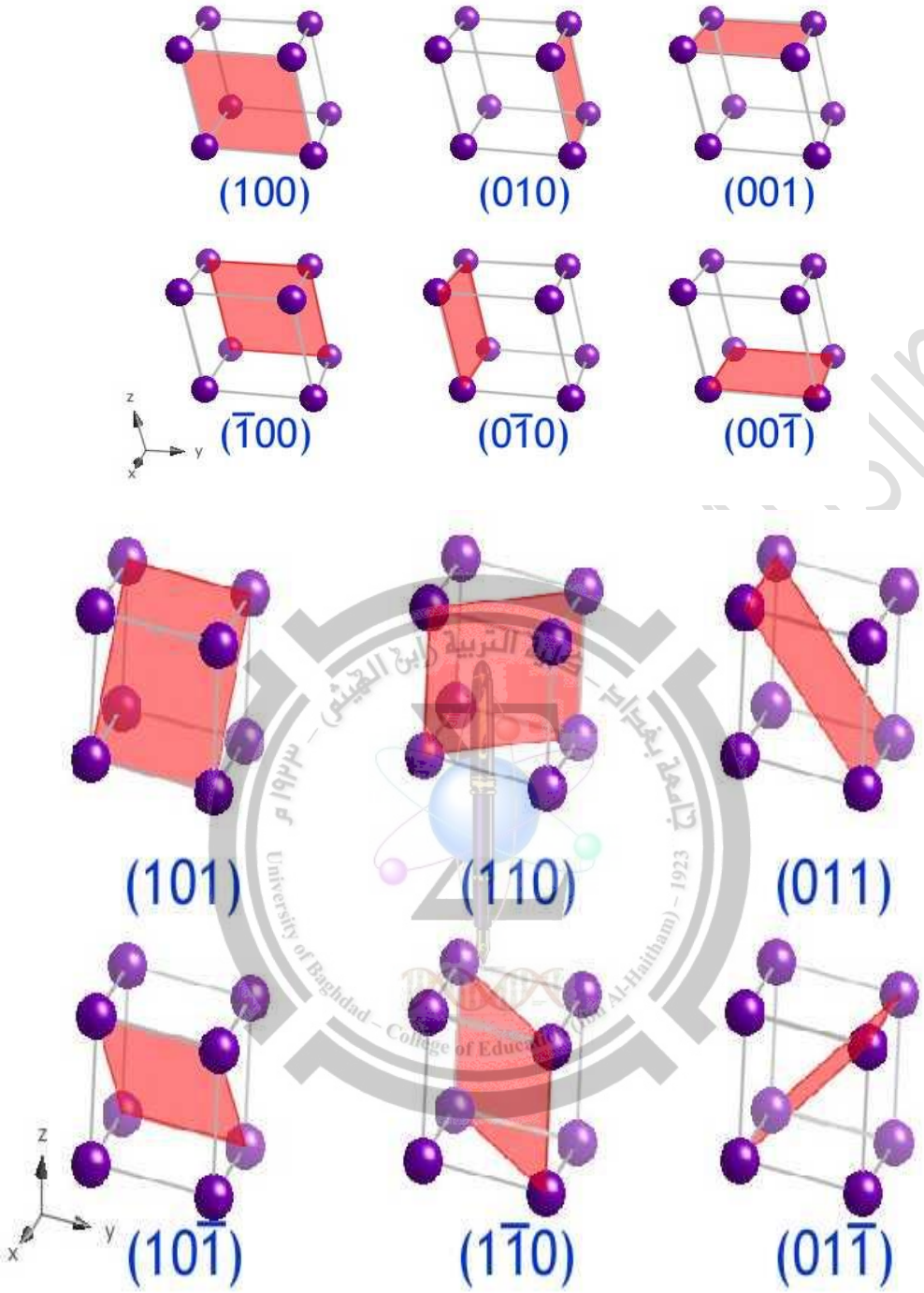
$$(333),(\bar{3}33),(3\bar{3}3),(33\bar{3}),(\bar{3}\bar{3}3),(\bar{3}3\bar{3}),(3\bar{3}\bar{3}),(\bar{3}\bar{3}\bar{3})$$

واذا كانت جميع قيم السطوح مختلفة ل {h k l} نحصل على 48 سطحاً مختلفاً متكافئاً مثل , {253} , {423} {134} وغيرها } . اما اذا كانت قيمتين متشابهتين من قيم {h k l} امكن الحصول على 24 سطحا متكافئا مثل : {133} , {224} , {115} حاول ايجاد السطوح ال 24 المكافئة .

س/ ارسم السطوح البلورية الاتية لنظام المكعب :

$$(200),(004),(023),(120),(0\bar{1}0),(001),(010),(222),(011),$$

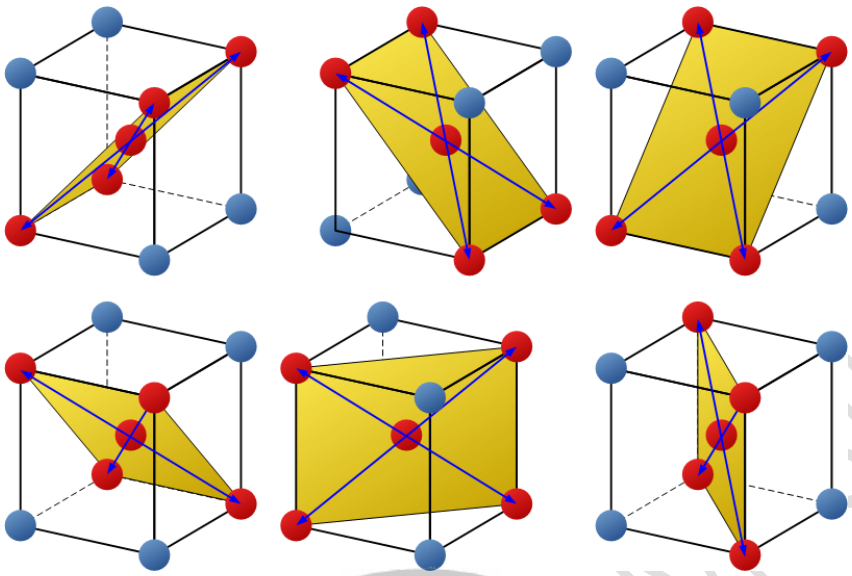
$$(331),(420),(2\bar{1}1),(\bar{1}31),(110),(\bar{1}10),(111),(020)$$



(100)
(010)
(001)
$(\bar{1}00)$
$(0\bar{1}0)$
$(00\bar{1})$
z
y
x

(101)
(110)
(011)
$(10\bar{1})$
$(1\bar{1}0)$
$(01\bar{1})$
z
y
x

س/ حدد معاملات ميلر للسطوح البلورية الآتية:



معاملات ميلر للشكل السداسي:

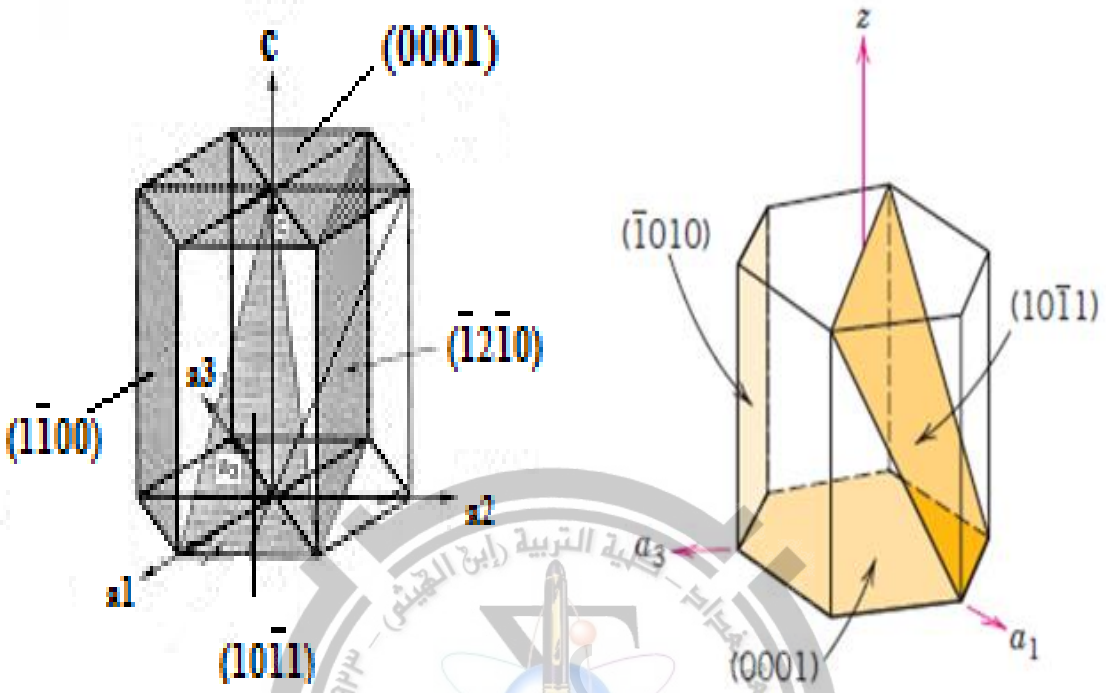
تمثل السطوح البلورية للشكل السداسي باربعة معاملات بدلا من ثلاثة وتكتب (h k i l)

مثال: احسب معاملات ميلر لسطح في الشكل السداسي تقاطعاته

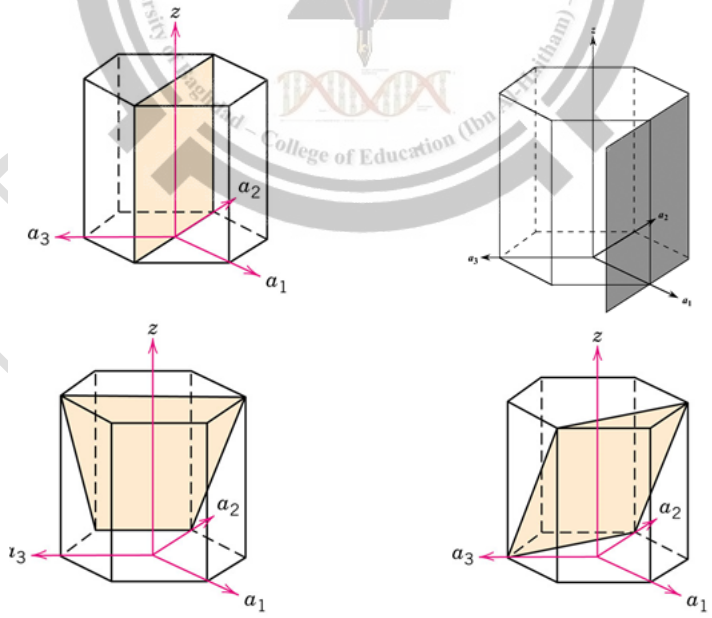
$a_1 = 1 \qquad a_2 = -1 \qquad a_3 = \infty \qquad c = \infty$

التقاطعات	∞	∞	-1	1
المقلوبات	0	0	-1	1
معلومات ميلر	$(1\ \bar{1}\ 0\ 0)$			

القاعدة العليا فمعاملات ميلر لها (0001) والقاعدة السفلى $(000\bar{1})$ ان محاور هذه الشبيكة تدعى بمحاور برافيز وهي تخضع للعلاقة الاتجاهية : $\overrightarrow{a_1} + \overrightarrow{a_2} = -\overrightarrow{a_3}$



س/ حدد معاملات ميلر للسطوح البلورية الآتية للشكل السداسي:



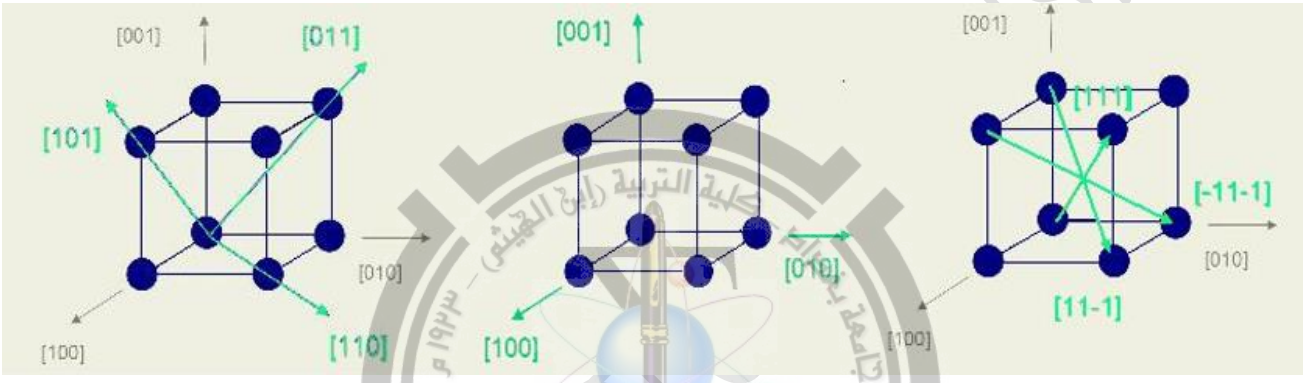
الاتجاهات البلورية: Crystal Direction (اتجاه المستوي البلوري)

لتعيين اي اتجاه في البلورة نأخذ معاملات ميلر ونشكل منها المستوي فيكون العمود على هذا المستوي هو اتجاه المستوي البلوري ويكتب اصطلاحا بالشكل[hkl] ليعبر عن الاتجاه فتكون المعاملات هي في نفس الوقت معاملات

الاتجاه. نستخدم ثلاثة معاملات هي u v w وتكتب بالصيغة [uvw] وهي اعداد صحيحة ليس لها عامل مشترك اكبر من الواحد وهناك اتجاهات متكافئة في البلورة وللدلالة عليها تكتب بالصيغة < uvw > فعند كتابة < 110 > يقصد بها جميع الاتجاهات المتكافئة من نوع :

$$[011], [101], [110], [0\bar{1}1], [01\bar{1}], [\bar{1}01], [10\bar{1}] \dots\dots$$

يسمى اتجاه ما في بلورة بمحور المنطقة او النطاق ومحور النطاق يمثل اتجاها مشتركا على طوله تتقاطع مجموعة من السطوح ويقال للسطوح المتقاطعة بان لها اتجاه مشترك واحد او محور نطاق واحد وإنها تنتمي الى النطاق نفسه.



ان معاملات ميلر (h k l) للسطح المنتمي الى نطاق معاملات ميلر محوره [uvw] يجب ان تخضع للعلاقة الجبرية $hu + kv + lw = 0 \dots (1)$ مثلاً : $(00\bar{1})$ مع [110] او $(0\bar{1}0)$ مع [101] وهذا يعني ان اي

سطح (h k l) يحوي الاتجاه [uvw] إذا تحققت المعادلة (1) ويمكن حساب معاملات محور النطاق [uvw] لسطحين متقاطعين مثل $(h_1 k_1 l_1)$ و $(h_2 k_2 l_2)$ كالآتي:

$$\left.\begin{aligned} u &= k_1 l_2 - k_2 l_1 \\ v &= l_1 h_2 - l_2 h_1 \\ w &= h_1 k_2 - h_2 k_1 \end{aligned}\right\} \dots\dots\dots(2)$$

ان جميع السطوح التي تكون معاملات ميلر بشكل (h k 0) تنتمي الى نطاق واحد محوره [001] مثل

ويمكن استخدام المعادلات (2) لايجاد معاملات ميلر (h k l) للسطح الذي يحوي الاتجاهين [u_1 v_1 w_1] و [u_2 v_2 w_2] كما يأتي:

$$\left.\begin{aligned} h &= v_1w_2 - v_2w_1 \\ k &= w_1u_2 - w_2u_1 \\ l &= u_1v_2 - u_2v_1 \end{aligned}\right\} \quad \text{..... (3)}$$

H.W : جد السطح (h k l) الذي يحوي الاتجاهين [110] و [211] باستخدام المعادلات (3) ثم جد الاتجاه الذي يتمثل ب [uvw] والذي ينتمي له السطحان (011)1 و (111) باستخدام المعادلات (2) .

حساب الزاوية المحصورة بين سطحين Ø:

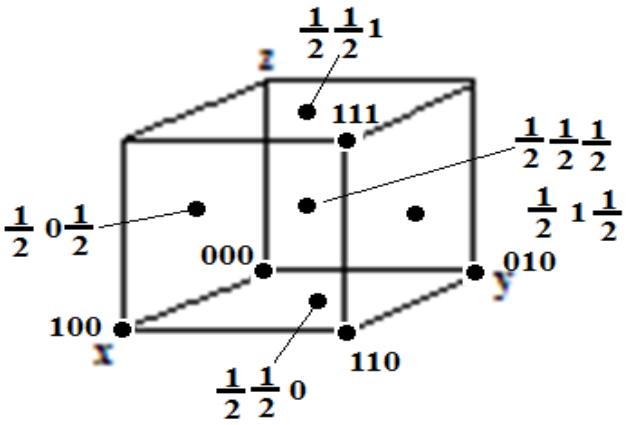
يمكن حساب الزاوية Ø بين ايسطحين (h_1 k_1 l_1) و (h_2 k_2 l_2) في بلورة مكعبة وهي تمثل الزاوية المحصورة بين العمودين على هذين السطحين كالاتي:

$$\emptyset = cos^{-1} \left\{ \left(\frac{(h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2)}{\left[(h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)\right]^{\frac{1}{2}}} \right) \right\}$$

H.W : جد الزاوية Ø المحصورة بين السطحين (312) و ($4\bar{2}1$) ثم بين [$12\bar{3}$] و [$\bar{2}01$] في بلورة مكعبة .

مواقع الذرات في خلية الوحدة Positoin of atoms in unit cell

يمثل موقع نقطة في خلية الوحدة بثلاثة احداثيات ذرية uvw حيث يمثل كل احداثي المسافة ما نقطة الاصل بوحدات محاور الخلية a , b , c وتكتب بالصيغة uvw بدون اقواس وبدون فواصل وتمثل مواقع الذرات داخل خلية الوحدة بوحدات كسرية اقل من الواحد ودائما لا تزيد قيمة uvw عن الواحد مطلقاً .



س/ جد الاتجاه الذي يربط النقطتين ¼ 0 ¾ و ¼ ½ ½

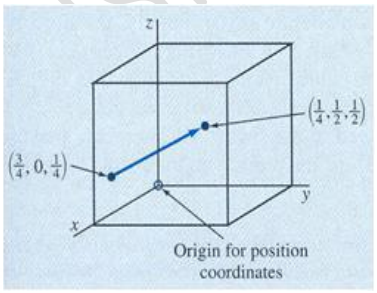
- Subtracting origin coordinates from emergence coordinates,

$$(1/4, 1/2, 1/2) - (3/4\ , 0\ , 1/4) = (-1/2, 1/2, 1/4)$$

- Multiply by 4 to convert all fractions to integers

$$4\ x\ (-1/2, 1/2, 1/4) = (-2, 2, 1)$$

- Therefore, the direction indices are $[\bar{2}\ 2\ 1\ ]$



فسحة السطوح d_{hkl} Planes Spcing

وهي تمثل المسافة العمودية بين اي سطحين متتاليين من مجموعة سطوح متوازية وتعطى d_{hkl} لاية مجموعة من السطوح المتوازية في بلورة مكعب طول ضلع خليتها الاعتيادية L (او a) بالعلاقة الاتية :

$$d_{hkl} = \frac{L}{\left(h^2 + k^2 + l^2\right)^{\frac{1}{2}}} \equiv \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

ونلاحظ من العلاقة ان d_{hkl} تعتمد على القيمة العددية لمعاملات ميلر ولا تعتمد على اشارات تلك المعاملات وهناك مجاميع مختلفة من السطوح المتوازية ذات معاملات ميلر مختلفة ولكنها متساوية الفسح d_{hkl} مثل : (333) , (511) والسطوح (600) , (422) .

وفيما يلي جدولاً لقيم $\frac{1}{d^2}$ لبعض الانظمة البلورية

نظام البلورة	حجم خلية الوحدة الاعتيادية	$\frac{1}{d^2}$
مكعب	a^3 أو L^3	$\frac{h^2+k^2+l^2}{a^2}$
رباعي	a^2c	$\frac{h^2+k^2}{a^2}+\frac{l^2}{c^2}$
معين قائم	abc	$\frac{h^2}{a^2}+\frac{k^2}{b^2}+\frac{l^2}{c^2}$
سداسي	$\frac{\sqrt{3}}{2}a^2c$	$\frac{4}{3}\left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2}\right)\frac{l^2}{c^2}$

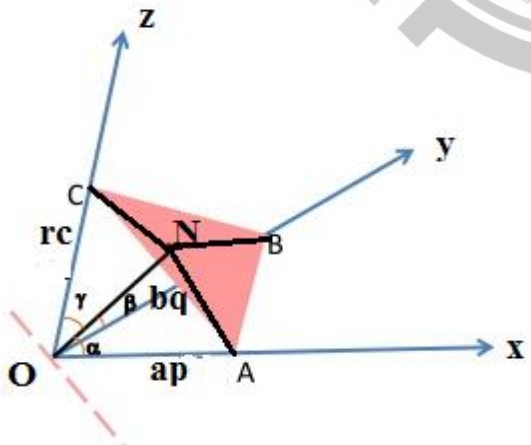
اثبت ان $d_{hkl}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ لنظام المكعب

في Δ ONA .

$$\cos\propto=\frac{ON}{OA}$$

ON تمثل المسافة العمودية بين السطح ABC ونقطة الاصل O وهي تمثل d_{hkl}

$$\therefore \cos\propto=\frac{d_{hkl}}{\frac{a}{h}}=\frac{h}{a}d_{hkl}$$



$$\therefore \cos\propto=\left(\frac{h}{a}\right)^2 d^2hkl.....(1)$$

ملاحظة : $OA=ap=a*\frac{1}{h}=\frac{a}{h}$

$$\Delta ONB:\cos B=\frac{ON}{OB}=\frac{d_{hkl}}{\frac{b}{k}}=\frac{k}{b}d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2\beta=\left(\frac{k}{b}\right)^2 d^2{}_{hkl}.....(2)$$

$$\Delta ONC = \cos\gamma = \frac{ON}{OC} = \frac{d_{hkl}}{\frac{c}{l}} = \frac{l}{c} d_{hkl}$$

$$\therefore \cos^2\gamma = \left(\frac{l}{c}\right)^2 d^2{}_{hkl} \ldots\ldots\ldots(3)$$ لدينا من المثلثات المتطابقة :

$$cos^2\alpha + cos^2\beta + cos^2\gamma = 1 \ldots\ldots\ldots (4)$$

نعوض (1) و (2) و (3) في (4) ينتج:

$$d_{hkl}^2 \left(\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2 \right) = 1$$

$$d_{hkl}^2 \quad \frac{1}{\left(\left(\frac{h}{a}\right)^2 + \left(\frac{k}{b}\right)^2 + \left(\frac{l}{c}\right)^2 \right)}$$ في المكعب a = b = c

$$\therefore \; d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

تمتاز السطوح الذرية ذات معاملات ميلر الصغيرة بما يأتي:

1- عرض الفسح بين السطوح d_{hkl} تكون كبيرة وتزداد كلما صغرت معاملات ميلر.

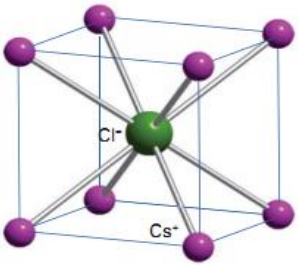
2- ضخامة كثافة الذرات لكل وحدة مساحة.

3- لها اهمية في تعيين الصفات الفيزيائية والكيميائية للمواد الصلبة.

تراكيب بلورية بسيطة Simple Crystal Structure

1- تركيب كلوريد السيزيوم Cesium Chlorid Structure (CsCl)

يمتلك كلوريد السيزيوم شبيكة برافيز مكعبة بسيطة Sc طول ضلعها 4.IIA والاساس مكون من ايونين هما Cl^- , Cs^+ . واذا افترض ان ايون السيزيوم يحتل احد اركان الشبيكة ولتكن نقطة الاصل للمكعب اي $Cs^+(000)$ فان ايون الكلور يحتل مركز المكعب اي الموقع $Cl^-\left(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)$.

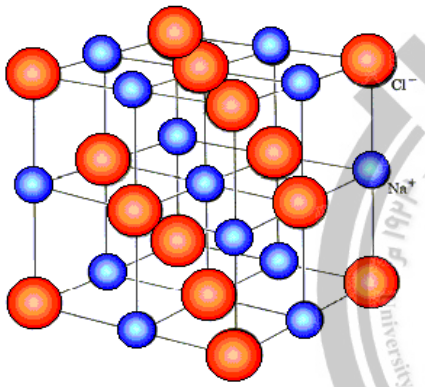


Cs^+ : 000

Cl^- : $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

2- تركيب كلوريد الصوديوم Sodium Chloride NaCl

يمتلك شبيكة برافيز من نوع مكعب متمركز الوجوه fcc طول ضلعها 5.63Å الخلية الواحدة الاعتيادية تحوي اربع نقاط شبيكة يرافق كل منها اساس مكون من ايونين احداهما Na^+ والاخر Cl^- تفصلهما مسافة قدرها نصف قطر خلية الوحدة المكعبة ولذلك تضم خلية الوحدة الاعتيادية اربعة ايونات صوديوم واربعة ايونات كلور اي اربعة جزيئات من كلوريد الصوديوم وتتوزع ايونات الكلور والصوديوم على المواقع الاتية :



تحفظ مهمة جدا

Na^+ : 000 , $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$, $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$

Cl^- : $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, $00\frac{1}{2}$, $0\frac{1}{2}0$, $\frac{1}{2}00$

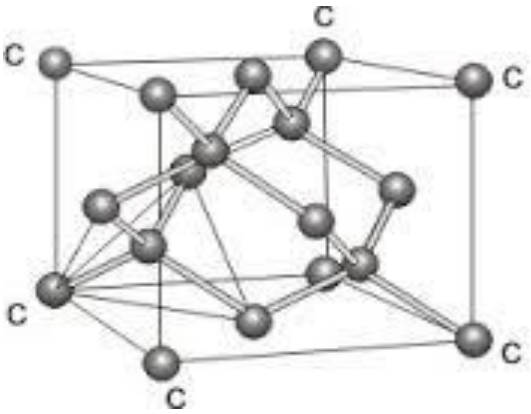
وهناك تراكيب مشابهة لتركيب كلوريد الصوديوم مثل :

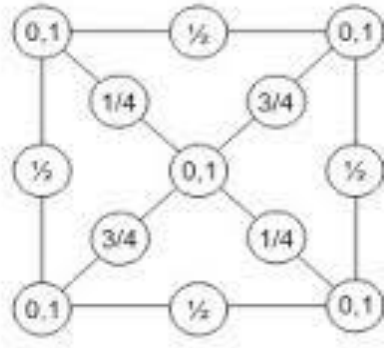
كلوريد البوتاسيوم وبروميد البوتاسيوم وبروميد الفضة .... الخ

3-تراكيب الماس Diamond Structure

تركيب له شبيكة برافيز من نوع مكعبة متمركزة الوجوه fcc طول ضلعها 3.56Å والاساس يكون من ذرتين متشابهتين من الكاربون C والمسافة بينهما تقدر بربع قطر خلية الوحدة المكعبة وان خلية الوحدة المكعبة الاعتيادية تحوي 8 ذرات كاربون موزعة على المواقع الاتية :

ذرة واحدة في احد اركان الخلية 000 وثلاث في مراكز اوجه الخلية $0\frac{1}{2}\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}0\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}\frac{1}{2}0$ واربع ذرات داخل الخلية , اثنتان قريبتان من قاعدتها السفلى عند المواقع $\frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$, $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ واثنتان قريبتان من قاعدتها العليا اي عند المواقع $\frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4}$, $\frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4}$ كما في الشكل :





ان كل ذرة كاربون مرتبطة باربع ذرات مجاورة (جوار اول) ارتباطا تساهميا وتكون محاطة باثنتي عشرة ذرة كجوار ثان وعلى الرغم من صلابة الماس العالية تكون نسبة الملء له لا تتجاوز 34% .

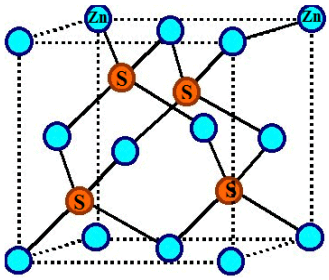
H.W : احسب نسبة الملء للماس . مساعدة: خذ السطح (110)

4- التركيب المكعبي لكبريتيد الزنك Cubic Zinc Structure ZnS

يدعى التركيب المكعبي لكبريتيد الزنك والمركبات المشابهة له بركان الزنك وهو تركيب مشابه لتركيب الماس والاختلاف الوحيد هو ان الاساس في حالة ZnS مكون من ذرتين هما Zn و S بدلاً من ذرتي الكاربون المتشابهتين في الماس وترتب ذرات Zn و S بحيث تحتل المواقع الذرية الاتية :

$$Zn : 000 \ , \ 0\frac{1}{2}\frac{1}{2} \ , \ \frac{1}{2}0\frac{1}{2} \ , \ \frac{1}{2}\frac{1}{2}0$$

$$S : \frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4} \ , \ \frac{1}{4}\frac{3}{4}\frac{3}{4} \ , \ \frac{3}{4}\frac{1}{4}\frac{3}{4} \ , \ \frac{3}{4}\frac{3}{4}\frac{1}{4}$$



ان حجم خلية الوحدة لكبريتيد الزنك حوالي ثلاث مرات ونصف بقدر حجم خلية الماس حيث ان طول ضلع خليه الوحدة لكبريتيد الزنك هو 5.41Å مما يجعل نسبة الملء صغيرة .

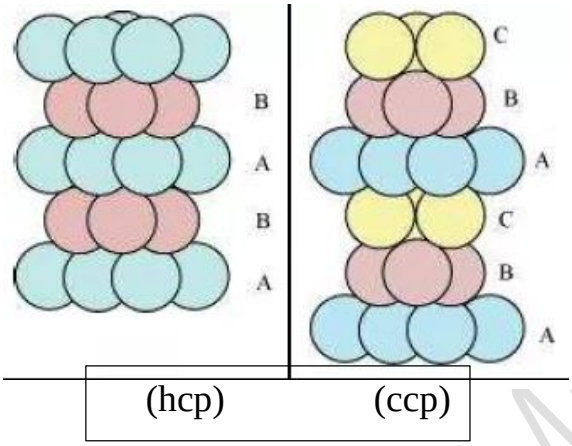
5- التركيب السداسي المقفل الملء والمتماسك hcp والمكعب المقفل الملء (ccp)

ان التركيب البلوري مكعب متماسك Cubic – closed packed (ccp) هو عبارة عن مكعب متمركز الوجه او سداسي متماسك Hexagonal closed packed (hcp) ومن الامثلة على تركيب مكعب متماسك بلورات :

Ar , HBr , HCl , NH_3 , Al , Ag , Cu في حين ان التركيب سداسي متماسك بلورات H_2 , O_2 , N_2 , SiO_2

Be , Mg , Zn , Cl

ان نسبة الملء لكل من (ccp) و (hcp) تساوي 0.74 وهي اكبر قيمة لنسبة ملء يمكن الحصول عليها لاي تركيب بلوري.



س/ بين أن النسبة c/a للتركيب السداسي المثالي هي : c / a = 8/3 = 1.633

h. . .height of the equilateral triangle

a. . .lattice constant

$$h = \sqrt{a^2 - (a/2)^2} = \sqrt{1 - \frac{1}{4}} * a = \sqrt{\frac{3}{4}} * a$$

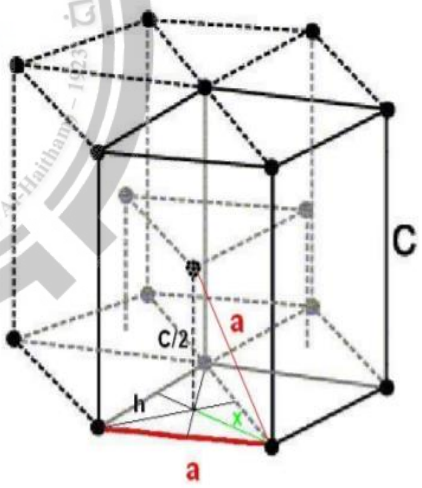
Distance x from an atom to the middle of the triangle:

$$x = \frac{2}{3} * h = \frac{2}{3} * \sqrt{\frac{3}{4}} * a$$

$$x = \frac{1}{\sqrt{3}} * a$$

$$\frac{c}{2} = \sqrt{a^2 - x^2} = \sqrt{a^2 - \frac{1}{3}a^2} = \sqrt{\frac{2}{3}} * a$$

$$\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$$



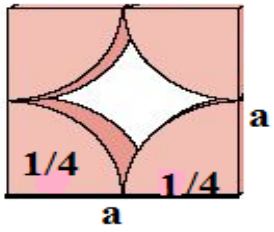
حساب كثافة المستويات ρ

(SC)*

1- لحساب كثافة المستويات {100}

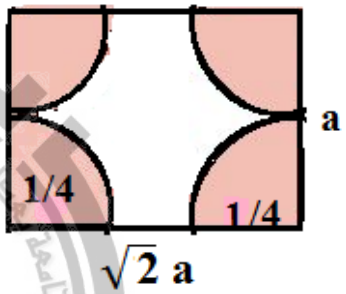
$$\rho = \frac{\text{No.of atoms}}{\text{Area}}$$

$$\rho = \frac{\frac{1}{4} * 4}{a^2} = \frac{1}{a^2}$$



2- لحساب كثافة المستويات {110}

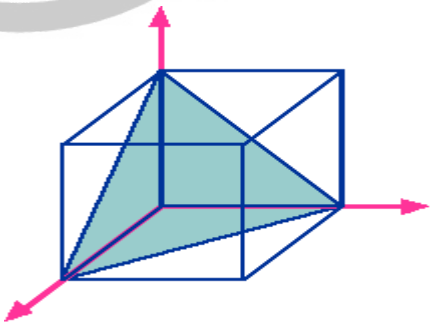
$$\rho = \frac{1}{a*\sqrt{2}a} = \frac{\frac{1}{4}*4}{\sqrt{2}a^2} = \frac{1}{\sqrt{2}a^2}$$



3- لحساب كثافة المستويات {111}

$$h = \sqrt{(\sqrt{2}a)^2 - \left(\frac{\sqrt{2}}{2}a\right)^2}$$

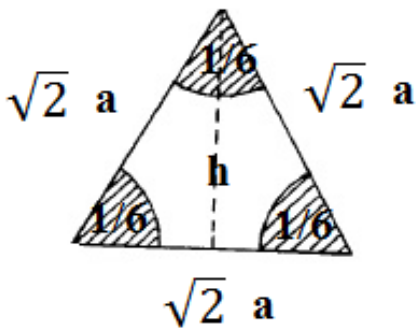
$$= \left(2a^2 - \frac{1}{2}a^2\right)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{\frac{3}{2}}a$$



$$\text{area} = \frac{1}{2}\sqrt{2}a * h$$

$$= \frac{1}{2}\sqrt{2}a * \frac{\sqrt{3}}{2}a$$

$$= \frac{\sqrt{3}}{2}a^2$$



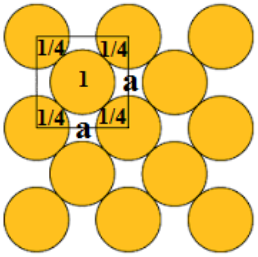
$$\rho = \frac{\frac{1}{6}*3}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{1}{\sqrt{3}a^2}$$

(FCC) **

1- للسطوح{100}

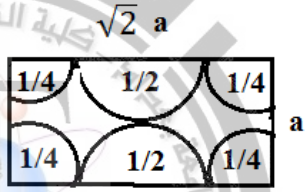
$\rho =$

2- للسطوح {110}



$$\rho = \frac{\frac{1}{4}*4+\frac{1}{2}*2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2} = \frac{\sqrt{2}}{a^2}$$

3- للسطوح {111}

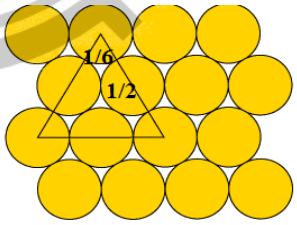


$$\rho = \frac{\frac{1}{6}*3+\frac{1}{2}*3}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2}$$

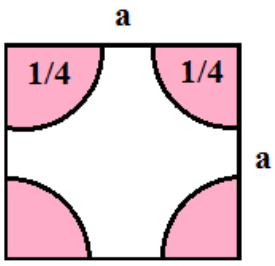
$$\rho = \frac{\frac{1}{2}+\frac{3}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{2}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{4}{\sqrt{3}a^2}$$

(BCC) ***

1- للسطوح {100}

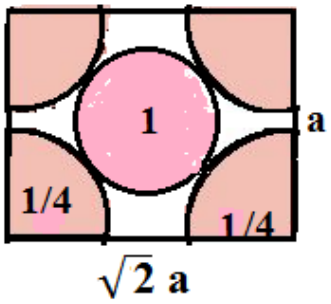


Prof. Dr. Taghreed Muslim



2- للسطوح {110}

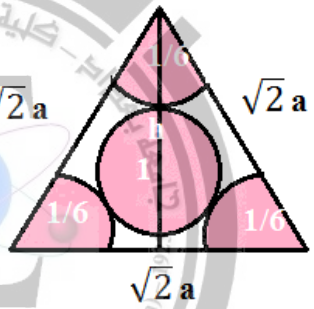
$$\rho = \frac{\frac{1}{4}*4+1}{\sqrt{2}a^2} = \frac{2}{\sqrt{2}a^2}$$



3- للسطوح {111}

$$\rho = \frac{\frac{1}{6}*3+1}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2}$$

$$= \frac{\frac{3}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}a^2} = \frac{\sqrt{3}}{a^2}$$



مسائل متنوعة

1. معدن له تركيب bcc ونصف قطر ذراته $1.342*10^{-10}$ m . إحسب المسافة البينية للمستويات (111).
2. تصوّر لديك خلية تقليدية لمكعب من نوع fcc , إستنبط خلية مكعبة بسيطة sc من هذه الخلية ثم قارن بينهما من حيث الحجم وعدد الذرات .
3. يتبلور البلاديوم Pd بتركيب fcc فإذا كانت كتلته الذرية 180.9 amu وكثافته $16.6\ g\backslash cm^3$, جد نصف القطر الذري .
4. إذا علمت أن طول ضلع الخلية في نظام المكعب هو 2.62 Å , جد زوايا براك المناظرة للانعكاسات من السطوح : (210),(100), (110), وارسم العلاقة البيانية بين d و θ علماً أن الطول الموجي للأشعة المستخدمة هو 1.54 Å .
5. يمتلك الإنديوم تركيبا رباعيا ومعلمات الشبيكة a =4.59 Å , c =4.95 Å.

(أ) إذا كان عامل الرص 0.693 ونصف القطر الذري 0.1625 nm ، جد عدد الذرات في خلية الوحدة.

(ب) يبلغ الوزن الذري للإنديوم 114.82 g\mol ؛ احسب الكثافة النظرية له.

6. عند تسخين الحديد يتعرض للانتقال من تركيب BCC الى FCC احسب نسبة معامل الرص BCC \ FCC لهذه المادة على افتراض ان ثابت الشبيكة لا يتغير.
7. احسب نسبة الجزء الفارغ لشبيكة الذهب Au نوع FCC.
8. احسب كثافة السطح الاكثر كثافة في تركيب BCC.
9. يمتلك Ni تركيب نوع FCC جد مسافة الجوار الثاني اذا علمت ان كثافته ووزنه الذري $8.83\ g/cm^3$ و 58.7 g/mol .
10. اشتق تعبيرا رياضيا لايجاد d_{hkl} لتركيب Tetragonal (رباعي).
11. لتركيب BCC لو فرضنا ان ذرة المركز أصبح نصف قطرها ثلاثة اضعاف ذرات الاركان فكم سيكون ثابت الشبيكة؟
12. جد كثافة مادة ذات تركيب رباعي ومحاور شبيكتها a=b =0.35 nm9, c=0.45nm ذات وزن ذري 141 g/mol.
13. التيتانيوم له تركيب HCP وكثافته $4.51\ g / cm^3$.(أ) ما هو حجم خلية الوحدة؟ (ب) احسب ثوابت الشبيكة (a و c) إذا كانت النسبة c/a= 1.58
15. يمتلك النيوبيوم نصف قطر ذري 1.43 Å وكثافته $8.57\ g/cm^3$. حدد فيما إذا كانت بنيته البلورية نوع FCC أو BCC.

المصادر:

1. فيزياء الحالة الصلبة　　　　د. مؤيد جبرائيل
2. فيزياء الجوامد　　　　د. محمد أحمد الجلالي
3. Introduction to Solid State Physics　　Charles Kittel
4. Fundamentals of Solid State Engineering　　Manijeh Razeghi
5. Materials Science and Engineering an Introduction　　William D. Callister